

## ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ИСТОЧНИКА ИОНОВ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА МТИ-350Г

Необходимость создания адекватной математической модели масс-спектрометра возникла в связи с большими материальными затратами при получении экспериментальных данных. И если моделирование магнитного анализатора, где реализуется разделение ионов магнитным полем по их массам, осуществляется сравнительно просто при помощи различных прикладных пакетов, таких, например, как SIMION, то моделирование источника ионов представляется более интересной физической задачей, которая решается, разделяясь на две задачи. Причем в каждой из задач применяются различные подходы к решению: так, при описании ионизационной камеры используется численный метод на основе метода Монте-Карло, а для вычисления траекторий и спектров ионов в ИОС применялся программный комплекс SIMION 3D версии 7.0. Эти две проблемы взаимно увязаны, и решение первой представляет собой входные данные для второй. Остановимся на каждом из этапов подробнее. В дальнейшем для определенности некоторых физических параметров будет рассматриваться модель масс-спектрометра МТИ-350Г.

Метод Монте-Карло – это метод прямого статистического моделирования, позволяющий моделировать реальную систему большим количеством модельных частиц. Основная идея, положенная в основу метода Монте-Карло, заключается в том, что эволюцию многочастичной системы можно рассматривать в два этапа:

1. *Движение частиц без взаимодействия друг с другом.* На этом этапе нейтральные молекулы двигаются, как и в стандартном методе, а на ионы молекул и электроны накладываются определенные правила движения, согласно электростатическому, созданному электродами и объемным зарядом, и магнитному полям.

2. *Взаимодействие частиц.* Помимо стандартного столкновения частиц в поставленной задаче необходимо рассматривать процессы неупругого взаимодействия частиц (ионизация, перезарядка и т.п.).

Таким образом, разбив процедуру на два этапа, мы непрерывно повторяем ее до тех пор, пока в системе не установятся стационарные потоки, и записываем в файл параметры ионов, которые покидают ионизационную камеру в сторону ИОС. На рис. 1 представлен результат описания разработанным методом упрощенной модели ионизационной камеры. В ходе процесса ионизации электронным пучком (синие частицы) нейтральных молекул (зеленые частицы) образуются положительно заряженные ионы (красные частицы) и вторичные электроны, которые впоследствии также могут вызвать ионизацию. Этот факт можно увидеть на рис. 1 – ионы образуются в ячейках, где электронный поток не проходит.

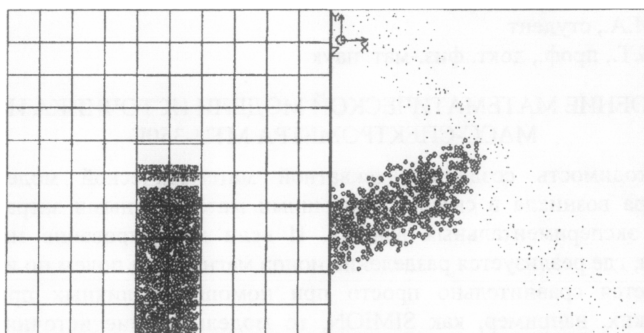


Рис. 1. Результат описания ионизационной камеры

После получения массива ионов необходимо построить модель ИОС, которая фокусирует пучок ионов и ускоряет их до необходимых скоростей. Модель строится при помощи программного комплекса SIMION, который позволяет рассчитывать электрические и магнитные поля и определять траектории движения заряженных частиц без учета их взаимного влияния. Для расчета распределения потенциалов используется решение уравнение Лапласа методом конечных разностей. В качестве граничных условий используются потенциалы точек, которые задаются в постановке задачи, например, потенциалы электродов. Геометрия электродов и их потенциалы можно определять при помощи специального редактора программы или при помощи так называемого геометрического компилятора. Для него была создана программа, задающая геометрию ИОС, в которой все линзы ИОС представляются в виде тел вращения с имеющимися вырезами.

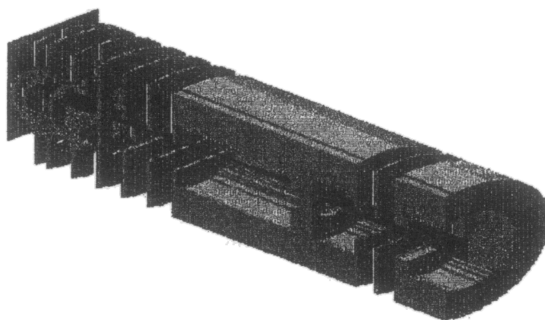


Рис. 2. Траектории ионов в ИОС

На рис. 2 приведено вертикальное сечение ИОС с траекториями ионов(синие линии) для одного из вариантов значений потенциалов электродов системы.